

## **Szakmai zárójelentés**

A F68726 projektszámú OTKA keretében végzett kutatásokról.

A projekt keretében végzett kutatási munka során az előzetes munkatervben kitűzött célokat sikerült elérni.

### **Mágneses nano-szerkezetek**

Vizsgálatam három Cr atomból álló, arany (111) felületre helyezett nanostruktúrák mágneses alapállapotát [1][4]. Kidolgoztam egy, a legkisebb négyzetek módszerén alapuló eljárást, amivel az ú.n. Kohn-Korringa-Rostoker Green függvényes elektron szerkezet számítási módszer relativisztikus változatával kapott eredményeket lehet leképezni egy klasszikus, másod- illetve negyed rendű kölcsönhatásokat tartalmazó spin modellre. Ez a módszer nem követel meg geometriai szimmetriát, ezért tetszőleges alakú nanostruktúrákra alkalmazható. A magas dimenziójú fázistérben a mágneses alapállapotot a momentumok irányát meghatározó ú.n. Landau-Lifshitz-Gilbert egyenletre alapozott spin-dinamikai számítások alkalmazásával kaptuk meg. A vizsgált esetekben megmutattuk, hogy a Cr trimerek konfigurációs energiáját az antiferromágneses elsőszomszéd kölcsönhatás dominálja, míg a második legfontosabb szerepet a bikvadratikus tagok játszik. Szabályos Cr hátomszög esetén frusztrált Néel típusú alapállapotot találtunk. Megmutattuk továbbá, hogy mivel a felületen sérül az inverziós szimmetria, a tisztán relativisztikus Dzyaloshinsky-Moriya kölcsönhatás is fontos szerepet

játszik az alapállapot kialakulásában. A lineáris és az egyenlőszárú háromszög esetén, kollineáris, antiferromágneses alapállapotot találtunk.

A mágneses nano-szerkezetek között fellépő kölcsönhatások döntően befolyásolják ezen anyagok mágneses tulajdonságait. Ennek a tényezőnek az alaposabb megismerése érdekében vizsgáltuk két Co atom kölcsönhatását különböző fémes felületeken (réz, ezüst, arany (001) és (110) felületek) [3]. Megmutattuk, hogy a felületeken lévő atomok közötti kölcsönhatás távolságfüggése jelentősen eltérhet a tömbi anyagokban tapasztalhatótól. Amíg tömbi anyagokban a jól ismert hosszú hatótávolságú Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) kölcsönhatás írja le a mágneses atomok együttes viselkedését addig (001) felületen nem lép fel hosszú távú kölcsönhatás. (110) felületen megtalálható a hosszú hatótávolságú kicserélődési kölcsönhatás, de annak az asszimptotikus viselkedése eltér az RKKY-tól.

Ab-initio módszerekkel vizsgáltuk két az iparban széleskörben elterjedt anti-ferromágneses anyag, az IrMn és IrMn<sub>3</sub> rendszerek mágnesesen rendezett fázisát [5]. A kölcsönhatások alakjára és erősségére vonatkozó számításaink segítségével megkonstruáltunk egy effektív spin modellt, ami lehetővé tette a számolások eredményeinek közvetlen összehasonlítását a vonatkozó kísérleti eredményekkel. Megmutattuk, hogy a IrMn<sub>3</sub>-ra vonatkozó számolásokból kapott szokatlanul erős másod-rendű mágneses anizotrópia amiatt léphet fel, mert három Mn alrácsban a lokális köbös szimmetria sérül.

Vizsgáltuk a felületen fellépő relativisztikus Rashba felhasadást alacsony szimmetriájú felületek esetén [6]. Az ú.n. kp-perturbáció számítás segítségével megmutattuk, hogy ezeken a felületeken a Rashba felhasadás anizotróp, ami egybevág a szimmetriamegfontolásokból kapható eredményekkel. Megmutattuk, hogy az anizotróp Rashba felhasadás nem magyarázható pusztán az általánosan használt elmélettel, ami csak a kristály-potenciál felületre merőleges változását veszi figyelembe.

### **Quantum szennyezők vezetési tulajdonságai**

Nem-egyensúlyi Anderson szennyező modell átlagtér megoldásának korlátait is vizsgáltuk [2]. Azt találtuk, hogy a paraméter tér (feszültség, hőmérséklet, on-site Coulomb tasztítás, betöltöttség) bizonyos részein, mind a mágneses, mind a nem-mágneses megoldás stabil volt. Továbbá megmutattuk, hogy a nem-egyensúlyi mágnesezettségben és áramban hiszeterézis található az alkalmazott feszültség függvényében. Az átlagtér módszer, hibásan, mágneses momentum és spin-polarizált áram kialakulását jósolta nagy feszültségek esetén, amiből azt a következtetést vontuk le, hogy az átlagtér közelítés minden olyan tartományban hibás, ahol lokális mágneses momentum kialakulását mutatja.

Egy következő cikkben két elektron szinttel rendelkező kvantum pötty (quantum dot) egyensúlyi és nem-egyensúlyi tulajdonságait vizsgáltuk az ú.n. szinglett-triplett átalakulás közelében. Ennél a vizsgálatnál az átlagtér elméleten túlmutató módszert

használtunk. Azt találtuk, hogy az alkalmazott perturbatív eljárással le lehet írni az ú.n. Kondo effektust és több más a kísérletekben mutatkozó effektust, ha a perturbáció nem túl erős [7]. Egy, a kérdést részletesen tárgyaló cikk jelenleg elbírálás alatt áll a Phys. Rev. B folyóiratnál [9].

### **Mott-Peierls szigetelők**

Vizsgáltuk egy különleges transzport tulajdonságokkal rendelkező anyag, a vanádium-dioxid ( $\text{VO}_2$ ), elektron-szerkezetét és optikai tulajdonságait ú.n. dinamikus átlagtér közelítésben (DMFT) [8]. Ez a módszer kombinálva a már tradicionálisnak számító elektron-szerkezetet vizsgáló módszerekkel új távlatokat nyithat meg az erőssen kölcsönható anyagok elméleti vizsgálatában. A vizsgált anyagot az teszi különlegessé, hogy fém-szigetelő átalakulást mutat szobahőmérséklet közelében, ami igen előnyös lehet különböző gyakorlati alkalmazásoknál (pl. ú.n. intelligens, fényre reagáló ablakok). A kutatás során azt vizsgáltuk, hogy az átalakulási hőmérsékletet mennyiben befolyásolja a hordozó anyagok által okozott strukrurális változás. A rács összenyomásának illetve széthúzásának a számolt elektron-szerkezetre gyakorolt hatása a szigetelő fázisban összhangban van a kísérletekkel. A számított tiltott sáv szélességének megváltozása jó egyezést mutatott a meglévő kísérleti eredményekkel és magyarázni tudtunk olyan kísérleti eredményeket is, amik eddig látszólagos ellentmondásban voltak az elméleti leírással. A számolt elektron-szerkezet részletei a spektroszkópiai eredményekkel (XAS, PES) is igen jó egyezést mutatnak, ami nagyban növeli az eddig

kísérletileg kevésbé vizsgált, módosult struktúrákra tett elméleti predikciók megbízhatóságát.

Az OTKA támogatásával kilenc cikk készült (egy bírálóat alatt):

1, "First-principles calculations of spin interactions and the magnetic ground states of Cr trimers on Au(111)"

A. Antal, B. Lazarovits, L. Udvardi, L. Szunyogh, B. Újfalussy, and P. Weinberger  
Phys. Rev. B **77**, 174429 (2008)

2, "Failure of the mean-field approach in the out-of-equilibrium Anderson model"

B. Horváth, B. Lazarovits, O. Sauret, and G. Zaránd  
Phys. Rev. B **77**, 113108 (2008)

3, "Ab-initio investigation of RKKY interactions on metallic surfaces"

E. Simon, B. Lazarovits, L. Szunyogh, and B. Újfalussy  
Phil. Mag. **88**, 2667–2672 (2008)

4, "Multiscale studies of complex magnetism of nanostructures based on first principles"

A. Antal, B. Lazarovits, L. Balogh, L. Udvardi, and L. Szunyogh  
Phil. Mag. **88**, 2715–2724 (2008),

5, "Giant magnetic anisotropy of the bulk antiferromagnets IrMn and IrMn<sub>3</sub> from first principles"

L. Szunyogh, B. Lazarovits, L. Udvardi, J. Jackson, and U. Nowak

Phys. Rev. B **79**, 020403(R) (2009)

6, "Anisotropic Rashba splitting of surface states from the admixture of bulk states:

Relativistic ab initio calculations and  $k \cdot p$  perturbation theory"

E. Simon, A. Szilva, B. Ujfalussy, B. Lazarovits, G. Zarand, and L. Szunyogh

Phys. Rev. B **81**, 235438 (2010)

7, "Perturbative theory of the non-equilibrium singlet-triplet transition"

B. Horváth, B. Lazarovits, and G. Zaránd

Journal of Physics: Conference Series **200**, 012063 (2010)

8, "Effects of strain on the electronic structure of VO<sub>2</sub>"

B. Lazarovits, K. Kim, K. Haule, and G. Kotliar

Phys. Rev. B **81**, 115117 (2010)

9, "Non-equilibrium transport theory of the singlet-triplet transition: perturbative approach"

B. Horváth, B. Lazarovits, and G. Zaránd

Phys. Rev. B *bírálat alatt*